

Title	斥力による多体相関(「配位相転移の研究」,基研長期研究計画)
Author(s)	小川, 泰
Citation	物性研究 (1974), 23(3): B27-B29
Issue Date	1974-12-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/88879">http://hdl.handle.net/2433/88879</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

で与えられる。 $g_n$  は  $n$  個の分子を含む輪を体系中に画く方法の数である。このような輪の総数は分子の総数による上限があるとする、転移が起り得る。これは  $g_n$  次元では転移に起らないことになるだろう。またこの転移は Bose 凝縮と同様で 2 次の転移となるだろう。

考えてみると今までのデータで Alder 転移が本当に 1 次の相転移であるといえるであろうか？ 2 次であるかも知れない。固相と液相とは配列の対称性がちがうから転移はドラマチックで 1 次になるはずであるともいわれているが、なしくずしに秩序が失われることも可能であろう。

最近の計算実験によれば、液相における分子運動は多分子の相関を示している。いいかえれば、多数の分子が連なって糸のように、あるいは渦のように流れに似た運動をおこなっているのがめだつ。上に考えた転位の輪もこのような流れを考慮した模型である。

ここで思いだすのは、昔 Braunbeck (研究会で、Herzfeld-G. Mayer といったのは誤り) が提出した奇妙な理論である (Z. f. Phys. 38 (1926) 549)。これは主に NaCl 型の 2 成分系を二つの部分格子から成ると考え、これらの相互のずれによるポテンシャルを  $U = A \sin^2(\pi x/l)$  とする。転移模型のと同じである。部分格子の相対的なずれのエネルギーを  $E$  とすると  $E < A$  のときは振動、 $E > A$  のときは進行運動になるが、 $E = A$  では振動周期は無限大で、運動エネルギーの平均はゼロになる。運動エネルギーの平均は絶対温度に比例する。したがって  $T$  を  $E$  の関数として表わすと  $r$  字形になる。 $\int dQ/T = \int dE/T = 0$  (等面積規則) によって融解温度  $T_m$  が定まる。これは Lindemann の法則を少し修正したような結果を与える。この Braunbeck の理論は統計力学の扱いとしては間違っているが、分子の集団的な流れのような運動と合わせて考えると大変興味深い。

(戸田盛和)

## 斥力による多体相関

京大・理 小 川 泰

融解論あるいは液体論では斥力に起因する多体相関が重要である。分子場近似的な考

小川 泰

え方では斥力は正の内部エネルギーになってしまうが、本当は粒子が斥けあうために位置のエネルギーはさ程大きくならず、斥けあいの多様性がエントロピー（量子論の場合には運動エネルギーの増大）に効く筈である。

古典系でのこのエントロピーを評価する工夫として、幾何学的制限を重視した確率統計論 — 統計幾何学的アプローチをわれわれは以前に試みたが、<sup>1)</sup> 三次元の場合の理論化は容易でない。その緒口を掴むために、統数研に移った種村氏が、計算機実験で得られた種々の状態の粒子配置をこの立場で精力的に解析している。Voronoi 多面体の面数分布、表面多角形分布、体積分布、表面積分布等種々のデータが集められており、Finney の解析<sup>2)</sup> の追試になっている。まだデータが少いので結論できないが、剛体球系と軟体球系は適当な密度対応を行えばこれらの諸データに関する限り相似な構造をもつといえそうである。幾何学だけから導ける法則を見逃して誤った統計処理を行ったりすることがないように、まず立体幾何学の感覚を体得することから始めて理論化を志している。理想固体及び理想気体の極限は比較的容易に理論化できるかもしれない。このアプローチがどれだけ融解の本質に迫れるかは未知数だが、幾何学的なランダムネスについては、ランダムネスの定義自体が明確でない<sup>3)</sup> 現在、配置の特色を如何に定量化するかというこの問題は、我々の考え及ばない広い分野に関わりをもっているようである。

電子相関についてのHubbard 模型等での斥力による多体相関も融解現象の 題と深いつながりがある。少くとも私はその関連を意識して考えている。最近われわれはこの問題で 10 年程前に提出されたGutzwiller 変分法<sup>4)</sup> という考え方を一般化し、反強磁性問題に適用した<sup>5)</sup>。詳しくはこゝで述べないが、この系は斥力のある Fermi 粒子格子気体模型であり、密度の異なる二相が共存する一次転移が導かれ、引力のない系での凝集という意味で Alder 転移と似ている。またこの変分法は Hartree-Fock 近似よりも広い試行関数をとるので、分子場近似よりも — 水準高い斥力系の近似法としても興味深い。

## 参 考 文 献

- 1) T. Ogawa and M. Tanemura, Prog. Theor. Phys. 51 (1974) 399.
- 2) J. L. Finney, Proc. Roy. Soc. A319 (1970) 479, 495
- 3) 樋口伊佐夫 物性研究 21 (1974) H 27. 数理科学 1973 年 8 月号 p. 6
- 4) M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Letters 10 (1963) 159; Phys. Rev. 134 (1964)

A923, 137 (1965) A 1726.

- 5) T.Ogawa, K.Kanda and T. Matsubara, Technical Report of ISSP A 668  
(1974). (to be published in Prog. Theor. Phys. vol.53 no. 4.)